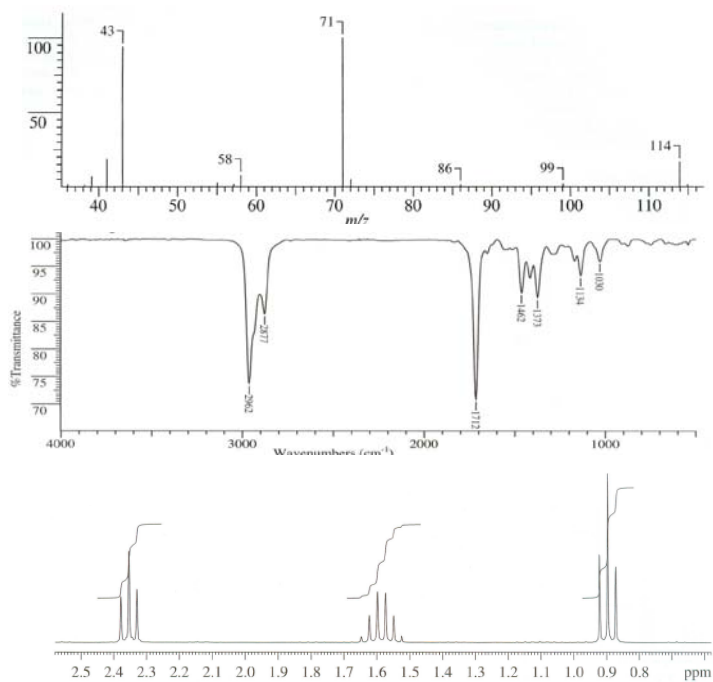
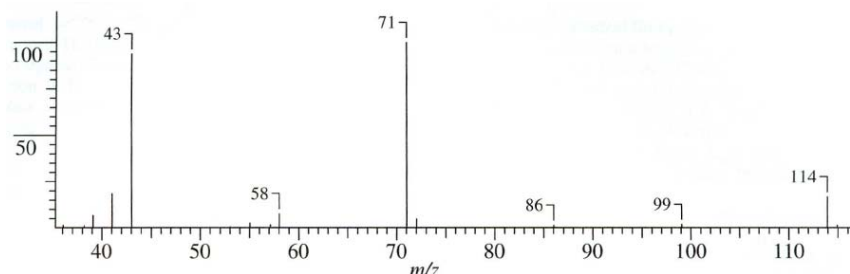


# Interpretace spekter

## Příklad identifikace neznámé organické sloučeniny



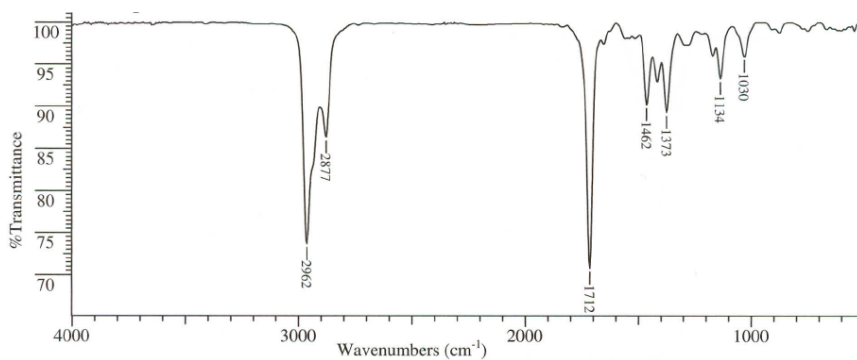
### EI-MS (normalizované spektrum)



$$M = 114$$

$$\frac{114}{13} = 8 + \frac{10}{13} \implies \text{základní uhlovdík } C_8H_{18} \quad U = 0$$

### IR



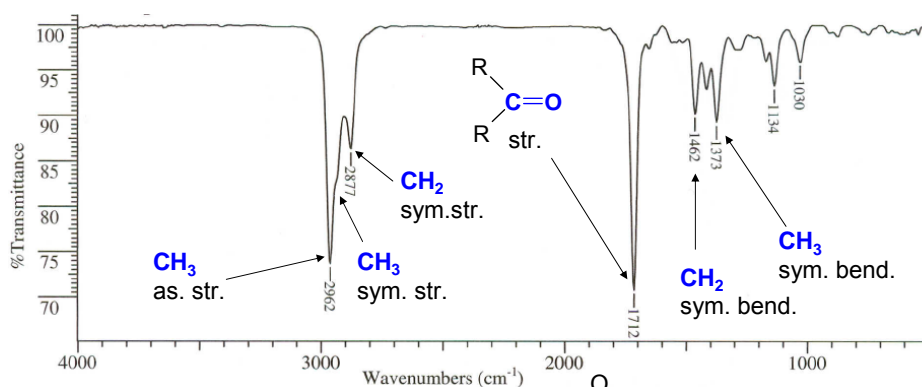
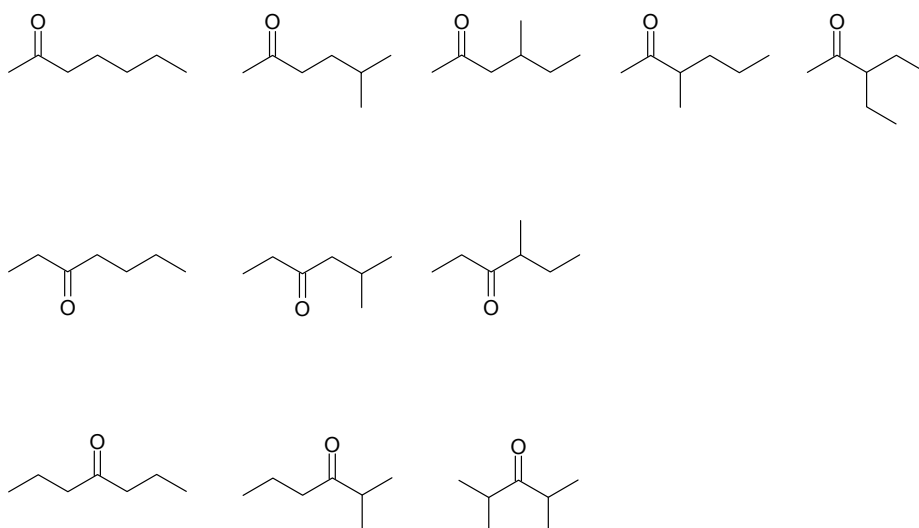
1712 cm<sup>-1</sup> signál karbonylové skupiny ( $\implies$  keton, ester nebo lakton)

možné molekulové vzorce – substituce ze zákl. uhlovdíku C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>

1 kyslík: C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O  $U = 1 + (2.7 - 14) / 2 = 1$

2 kyslíky: C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>  $U = 1 + (2.6 - 10) / 2 = 2$

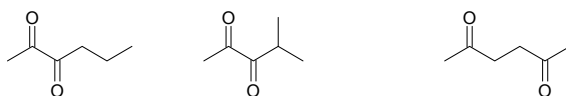
Keton C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O, stupeň nenasycenosti 1

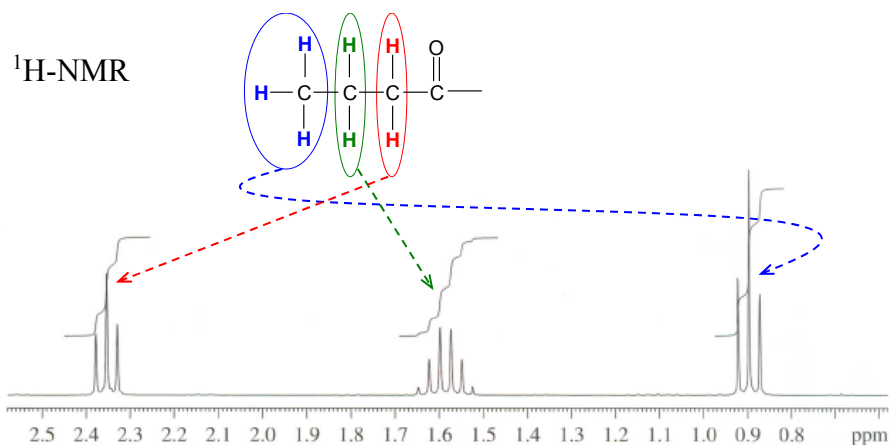


ve spektru chybí silný absorpční pás vibrace  $\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{C}$  cca 1100–1300  $\text{cm}^{-1}$   
 $\implies$  nejde o ester ani lakton

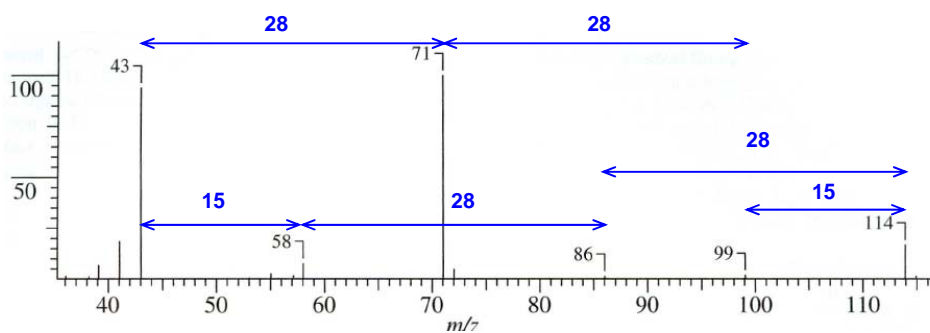
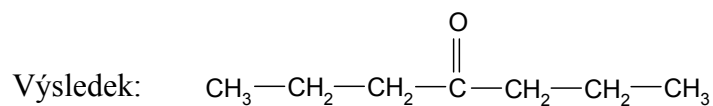
ve spektru chybí široký signál vibrace  $\text{O}-\text{H}$  cca 3300  $\text{cm}^{-1}$   
 $\implies$  nejde o hydroxy-keton

v úvahu ale připadají kromě ketonů C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O také  $\gamma$ - nebo  $\alpha$ -diketony C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>





0,89 ppm – triplet, rel. intenzita 3  $\implies$  skupina  $\text{CH}_3$   
 1,58 ppm – sextet, rel. intenzita 2  $\implies$  skupina  $\text{CH}_2$   
 2,36 ppm – triplet, rel. intenzita 2  $\implies$  skupina  $\text{CH}_2$  } *n*-propylová skupina



molekulový ion M 114:  $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}^+$   
 hmotnostní rozdíly 15:  $\text{CH}_3$   
 28:  $\text{C}_2\text{H}_4$  (ethylen)  
 fragmentové ionty 99: M minus  $\text{CH}_3$ , tj.  $\text{C}_6\text{H}_{11}\text{O}^+$   
 71: M minus  $\text{CH}_3$  minus  $\text{C}_2\text{H}_4$ , tj.  $\text{C}_4\text{H}_7\text{O}^+$   
 43: M minus  $\text{CH}_3$  minus 2krát  $\text{C}_2\text{H}_4$ , tj.  $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}^+$

